

## Информация за финансиран на проект

<b>Наименование на конкурса:</b>
Конкурс за финансиране на фундаментални научни изследвания – 2021 г.
<b>Основна научна област:</b>
Химически науки
<b>№ на договор:</b>
КП-06-Н59/6
<b>Начална дата на проекта и срок на договора:</b>
Срок 36 месеца
<b>Заглавие на проекта:</b>
Молекулен дизайн на фотоактивни метал-съдържащи системи с перспективни приложения (PhotoMetalMod)
<b>Базова организация:</b>
Институт по обща и неорганична химия – Българска академия на науките
<b>Партньорски организации:</b>
-
<b>Ръководител на научния колектив (академична длъжност, научна степен, име):</b>
професор , д-р Ивелина Мирчева Георгиева
<b>Общ размер на договореното финансиране:</b>
170 000 лв.

**Резюме на проекта (до 1 стр. в рамките на полето по-долу):**

Фотоактивните метал-съдържащи системи са клас съединения, в които при облъчване в ултравиолетовата или видимата област настъпват специфични фотовъзбудени процеси, чиито фотофизични проявления намират заинтригуваща приложимост като луминесцентни устройства, фотокатализатори за отпадни газове, средства за защита от ултравиолетово лъчение, сензори за ултравиолетова светлина, маркери, специфични оптични филтри, биоактивност и др. Напредъкът и технологичното развитие на фотоактивните метал-съдържащи материали се определя от възможността за задълбочено разбиране на фотофизичните процеси, определяне на факторите, които водят до фотоактивния отговор и насочено подобряване на функционалността им. Съвременните бързо развиващи се теоретични подходи и компютърни мощности дават нова перспектива за разработването на функционални метало-фотоактивни материали с икономическа и обществена значимост. В настоящия проект, чрез молекулно моделиране и теоретичен анализ ще бъдат детайлно изучени три типа фотоактивни метални системи с перспективни приложения: 1) луминесцентни лантанидни системи с фосфиноксидни и дитиокарбаматни антена хромофори; 2) клъстери и комплекси на оксиди и сулфиди на преходни метали с фотокаталитична приложимост за разлагане на вода, редукция на въглероден диоксид и азотни оксиди и 3) метални комплекси на 2-карбамидо-1,3-индандион за медицински приложения като UV защита, биоактивност и др. Основната задача е подбор на приложим изчислителен протокол с използване на емпирични, полуемпирични и квантовохимични методи и подходящи моделни системи – молекули, клъстери и периодични структури, както и методология описваща структури и процеси в основно и възбудено състояние. Всички данни от експерименталните изследвания – синтез, физико-химично и спектроскопско охарактеризиране, получени от колектива по проекта или от литературата ще съпътстват теоретичното изследване. Резултатите от изследването ще бъдат полезни в няколко направления:

- **Фундаменталност:** разработване на широк спектър специфични теоретични подходи към три групи перспективни фотоактивни метал-съдържащи системи; комбиниращият теоретичен и експериментален подход има мощен синергичен ефект за дизайн на метални системи с подобрена фотофизична функционалност; значително разширяване компетентността на екипа в областта на химията на оптични метал-съдържащи системи.

- **Потенциална приложимост:** Резултатите от изследванията на фотоактивните метални системи ще са полезни, за разкриване на потенциала на специфичните фотофизични проявления при всяка група метални системи за висок луминесцентен квантов добив, фотокаталитична активност и кожна фотозащита, за изясняване на механизма на приложното им фотофизично свойство, както и за намиране на възможни пътища за подобряване на тяхната фотоактивна функционалност със значимост в лазерни технологии, очистване на въздуха от отпадни газове и за медицинска приложимост.

- **Новаторство:** Изследователският теоретичен подход при изучаване на луминесцентните, фотокаталитичните и абсорбционни системи и съответните фотовъзбудени процеси се прилага в тясно взаимодействие с експеримента. Получените резултати и зависимости ще се използват за обясняване, предсказване и оптимизиране на функционалността на новите фотоактивни метални материали, с което ще се засили предсказателната сила на теорията.

## Членове на научния колектив

Организации/участници <sup>1</sup>	Бележка <sup>2</sup>
<b>Базова организация:</b>	
Институт по обща и неорганична химия, Българска академия на науките	
<b>Ръководител на научния колектив</b>	
проф. д-р Ивелина Мирчева Георгиева – ИОНХ-БАН	учен
<b>Участници:</b>	
проф. дхн Венелин Георгиев Енчев – ИОНХ-БАН	Учен
проф. д-р Наташа Средкова Трендафилова – ИОНХ-БАН	Пенсионер
доц. д-р Ели Любенова Узунова – ИОНХ-БАН	
гл. ас. д-р Цветан Красимиров Захариев – ИОНХ-БАН	Учен
ас. д-р София Олеговна Славова – ИОНХ-БАН	Млад учен
ас. Нина Бойкова Стоянова-Нанкова – ИОНХ-БАН	Млад учен
Пенчо Бойков Бейков – ИОНХ-БАН	Млад учен
Борис Стефанов Борисов – ИОНХ-БАН	Млад учен
гл. ас. д-р Деница Кирилова Еленкова – ФХФ-СУ (индивидуален участник)	Студент
доц. д-р Мартин Петров Цветков - ФХФ-СУ (индивидуален участник)	Студент
д-р Ангел Георгиев Угринов – North Dakota State University	Учен
	Учен
	Учен от чужбина
<b>Партньорска организация:</b>	
-	
<b>Участници: -</b>	
-	

1 Отбележете академичната длъжност, научната степен, име и фамилия на всеки участник като включите и участниците, които са работили по проекта не през целия период за изпълнение на проекта

2 Отбележете дали участникът в колектива е млад учен (МУ), постдокторант (ПД), докторанти (ДО) или студенти (СТ), или учен от чужбина (УЧ).